

## **Синтез мультимодальных систем на основе магнитных наночастиц для биомедицинского применения**

**Дёмин Александр Михайлович**

*Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН*

*[demin@ios.uran.ru](mailto:demin@ios.uran.ru)*

В настоящее время внимание исследователей в области физики, нанохимии, биологии и медицины сосредоточено на разработке методов получения новых материалов и использования их в качестве диагностических (биочипы для иммуноанализа, агенты для усиления контраста при проведении магнитно-резонансной томографии) и терапевтических (точечная лазерная и магнитная гипертермия) агентов, как систем фармацевтической доставки лекарств, материалов для молекулярной сепарации и клеточной инженерии, а также магнитосепарируемых катализаторов [1, 2].

Наиболее часто в данных целях используют наночастицы на основе металлов и их оксидов, характеризующихся высокими магнитными свойствами, в первую очередь  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ,  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ ,  $\text{FePt}$  и др., которые могут выступать в роли платформы для разработки мультимодальных систем. Наиболее востребованными для биологических и медицинских целей являются магнитные наночастицы (МНЧ)  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  по причине их низкой токсичности, биосовместимости и биоразлагаемости.

Для получения многофункциональных структур на основе МНЧ существует две стратегии. Первая заключается в интеграции МНЧ с квантовыми точками или наночастицами металлов с образованием «core-shell» и гетеродимерных нанокомпозитов. Вторая стратегия заключается в проведении поверхностной модификации за счёт ковалентного или нековалентного связывания различных классов органических молекул с поверхностью МНЧ.

Одним из наиболее эффективных в настоящее время методов модификации МНЧ является ковалентное связывание органических молекул с их поверхностью при использовании функционализированных алкоксисилановых реагентов. В результате модификации МНЧ полученные нанокомпозиты приобретают ряд свойств, позволяющих использовать их в медицинских целях: стабильность в биологических средах (жирные кислоты, полиэтиленгликоль и его производные, биополимеры), специфичность доставки и удержания препарата в требуемых тканях (антитела, аптамеры, пептиды) и др.

В докладе рассмотрены основные методы синтеза мультимодальных агентов на основе МНЧ, а также наиболее перспективные направления их использования в медицине, биологии и химии [3-6].

*Работа выполнена при финансовой поддержке Комплексной программы УрО РАН (№ 15-21-3-6) и проекта РФФИ (№17-03-01001).*

Список публикаций:

- [1] Bakhtiary Z., Saei A.A., Hajipour M.J., et al. // *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology, and Medicine*. 2016. V. 12. P. 287.
- [2] Reddy L.H., Arias J.L., Nicolas J., et al. // *Chem. Rev.* 2012. V. 112. P. 5818.
- [3] Demin A.M., Pershina A.G., Ivanov V.V., et al. // *Inter. J. Nanomed.* 2016. V. 11. P. 4451.
- [4] Demin A.M., Pershina A.G., Nevskaya K.V., et al. // *RSC Adv.* 2016. V. 6. P. 60196.
- [5] Savvateeva M.V., Demin A.M., Krasnov V.P., et al. // *Anal. Biochem.* 2016. V. 509. P. 146.
- [6]. Demin A.M., Ulitko M.V., Minin A.S., et al. // *Dokl. Chem.* 2016. V. 467. P. 118.

## **Моделирование фемтосекундной внутримолекулярной динамики высоковозбужденных молекул йода**

**Дозморov Николай Владимирович**

*Новосибирский национальный исследовательский государственный университет*

*Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН*

*Бакланов Алексей Васильевич, д.х.н.*

*[ndozmorov@yandex.ru](mailto:ndozmorov@yandex.ru)*

Для понимания явлений, происходящих в природе при возбуждении молекул светом (фотосинтез, процессы фотохимии атмосферы и т.д.), необходимо исследовать механизмы и динамику процессов, протекающих в молекулах под действием электромагнитного излучения (фотоиндуцируемых процессов).

Для изучения динамики внутримолекулярных процессов с фемтосекундным временным разрешением широко используется подход «накачка-зондирование» (pump - probe). Данный подход состоит в облучении системы двумя лазерными импульсами с варьируемым промежутком времени между ними. Первый импульс

возбуждает молекулу в состояние, из которого она с течением времени переходит в изучаемое состояние ионной пары. Второй импульс используется для зондирования состояния системы в определяемый задержкой между импульсами момент времени.

В экспериментах, выполненных совместно сотрудниками ИХКГ СО РАН и Фрайбургского университета, этот подход использовался для изучения динамики молекул  $I_2$  при их фотовозбуждении в состояния ионной пары. При этом для зондирования состояния волнового пакета использовалось измерение «мгновенного» распределения по кинетической энергии относительного движения ионов  $I^+$  и  $I^-$  в состоянии ионной пары с использованием техники измерения карт скоростей фотофрагментов (описание техники измерения карт скоростей (velocity map imaging) дано в работе [1]).

Данная работа посвящена моделированию фемтосекундной внутримолекулярной динамики высоковозбужденных молекул  $I_2$ . В рамках нее проведено рассмотрение динамики с точки зрения классической и квантовой механики. Основные цели моделирования – описать динамику внутримолекулярных процессов и получить распределение по кинетической энергии относительного движения ионов в возбуждаемых состояниях ионной пары как функцию времени, что позволит сравнить эти данные с экспериментально полученными. Все численные расчеты проведены с помощью системы Wolfram Mathematica.

При классическом описании движения система была рассмотрена в виде точечной частицы, находящейся в потенциале, соответствующем изучаемому состоянию ионной пары. Процесс ее появления в данном состоянии рассматривался как экспоненциальный распад из состояния, возбуждаемого излучением. Описывая движение частицы с помощью классических законов, была получена зависимость распределения по кинетической энергии от задержки между импульсами, которая затем сравнивалась с экспериментальными данными [1].

Для квантовомеханического описания системы было проведено моделирование движения волнового пакета при возбуждении молекулы из основного состояния в состояние ионной пары. Распространение волнового пакета рассчитывалось с помощью метода расщепления экспоненциального оператора (exponential split operator method) [2]. Интегрируя часть пакета с низкой кинетической энергией, была получена зависимость количества частиц с низкой кинетической энергией в зависимости от задержки между импульсами.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-53-12025).*

Список публикаций:

- [1] Eppink A. T. J. B., Parker D. H. // *Rev. Sci. Instrum.* – 1997. – V. 68, № 9. – C.3477 - 3484.
- [2] Feit M.D.; Fleck J.A., Jr.; Steiger A. // *J. Comput. Phys.* – 1982. – V. 47, №3. – C.412 - 433.
- [3] von Vangerow J. et al. // *Physical Chemistry Chemical Physics.* – 2016. – T. 18. – №. 28. – C.18896-18904.

## **Получение оксидов титана и вольфрама в молекулярном пучке**

**Ершов Кирилл Сергеевич**

*Новосибирский государственный университет*

*Бакланов Алексей Васильевич, д.х.н.; Кочубей Сергей Александрович, к.ф.-м.н.*

*KErshov93@gmail.com*

Возможность генерации полупроводниковых материалов (диоксид титана, триоксид вольфрама и т.д.) представляет большой практический интерес [1]. Реализация этого позволит исследовать элементарные фотопроцессы, связанные с применением этих материалов в водородной энергетике и фотокатализе, с использованием высокоэффективных методов исследования [2].

В представленной работе предпринята попытка генерации оксидов титана и вольфрама в молекулярном пучке двумя методами: из летучих соединений гексакарбонила вольфрама и изопропоксида титана и абляцией титановой и вольфрамовой фольги. Для фотовозбуждения молекул и их комплексов использовалось излучение четвертой гармоники твердотельного Nd:YAG лазера на длине волны 266 нм.

В работе представлены результаты изучения фотохимических процессов, протекающих при УФ фотовозбуждении летучих соединений  $W(CO)_6$  и  $Ti(OC_3H_7)_4$  и их комплексов с кислородом, а также результаты двухлазерных экспериментов (метод абляции и метод фотодиссоциации летучих веществ в сочетании с фотоионизацией продуктов), полученные с помощью времяпролетной масс-спектрометрии. На рис. 1 в качестве примера приведены масс-спектры фотофрагментов, образующихся при возбуждении молекул  $W(CO)_6$ , и указывающие на образование атомов вольфрама и его оксида.